

## АНОТАЦІЯ

Методами комп'ютерної біології, здійснено реконструкцію просторової будови білків системи вродженого імунітету TLR3, MyD88 та TRIF задля подальшого проведення молекулярного докінгу із рядом низькомолекулярних сполук-інгібіторів і формування бібліотеки сполук-лідерів. Підґрунтям для даного дослідження є наукові роботи, що повідомляють про роль досліджуваних нами імунних компонентів у функціонуванні нервової системи, а також описують шляхи, за якими порушення їх нормальної роботи сприяє розвитку захворювань нервової системи.

Протягом аналізу біоінформатичних баз даних, було визначено особливості функцій та будови білків TLR3, MyD88 та TRIF, їх генів, а також проінспектовано існуючі їх структурні моделі для відбору найякісніших і найповніших фрагментів задля гомологічного моделювання.

У роботі над моделюванням білкових структур було задіяно такі інструменти, як: онлайн-ресурси I-TASSER, QUARK та програмне забезпечення Modeller для здійснення гомологічного моделювання та моделювання *de novo*. Під час аналізу хімічних баз даних, було відібрано список хімічних сполук, що мають інгібіторні властивості до TLR3, MyD88 або TRIF. Кінцевим етапом роботи було, із застосуванням програмного пакету для докінгу та віртуального скринінгу Glide від Schrödinger, формування бібліотеки сполук із найвищими показниками зв'язування у доменах цільових білків.

Кваліфікаційна робота викладена на 49 сторінках, ілюстрована 2 таблицями, однією схемою та 9 рисунками. Список використаних джерел включає 44 роботи.

**Ключові слова:** TLR3, MyD88, TRIF, імунітет, нервова система, інгібітори, молекулярний докінг, віртуальний скринінг.